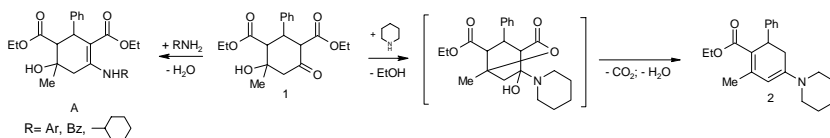


циклолактонизации, обусловленной α,ϵ -цис-расположением гидроксильной и удаленной сложноэфирной групп; распад лактонного интермедиата (декарбоксилирование) и дегидратацию.



Таким образом, пиперидин выполняет роль нуклеофильного реагента и катализатора реакции дегидратации-декарбоксилирования.

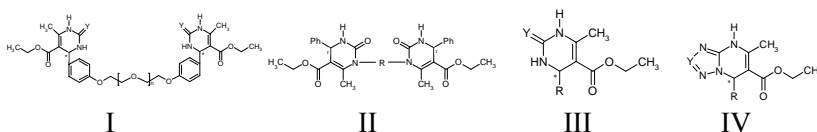
Полученные данные открывают путь перехода от доступных β -циклокетолов к полиядерным системам, содержащим фармакофорный пиперидиновый фрагмент.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТУБЕРКУЛОСТАТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ СОЕДИНЕНИЙ ДИГИДРОПИРИМИДИНОВОГО РЯДА

*Переяславская Е.С., Потемкин В.А., Гришина М.А., Жидовинова М.С.,
Федорова О.В., Русинов Г.Л.*

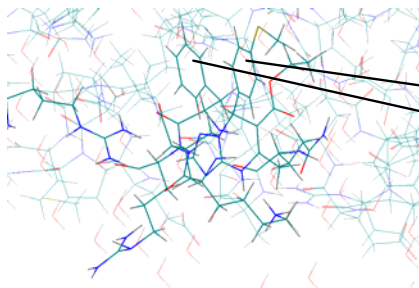
Челябинский государственный университет,
Институт органического синтеза УрО РАН, Екатеринбург

Осуществлено исследование туберкулостатической активности для выборки дигидропиримидинов:



Проведено комплексное исследование закономерностей влияния структурных характеристик дигидропиримидинов на туберкулостатическую активность. Выполнено моделирование взаимодействия лекарственных средств с дигидрофолатредуктазой (метод 3D-QSAR BiS [1]), и определены особенности связывания лигандов с рецептором.

Отмечено, что туберкулостатическая активность соединений пропорциональна увеличению электронодонорных свойств молекул (соединения выступают в роли акцепторов протонов). Конформация соединений с подандной цепью («молекулярная полость») обеспечивает возможность комплексообразования с катионами металлов, которые формируют донорно-акцепторные связи с гетероатомами колец.



π - π взаимодействие
ароматических колец
лекарственного
соединения и PHE(31).

Молекула лекарственного средства в полости рецептора связывается с ARG(32,60), VAL(54), GLN(28), PHE(31), LYS(53).

Механизм действия лекарственных средств включает стадии захвата катионов металлов и выведение их из внутриклеточного пространства; а так же угнетения функций дигидрофолатредуктазы путем захвата атомов водорода. Найдены специфические контакты соединений с рецептором, обеспечивающие избирательное действие лекарственных средств.

Созданы прогностические модели для анализа и оценки новых потенциальных лекарственных средств. Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ.

1. Potemkin V.A., Bartashevich E.V., Grishina M.A., Guccione S. Rational Approaches to Drug Design.- Barcelona: Prous Science Publishers, 2001.- P. 349 – 353.

О РЕАКЦИЯХ МЕТАНСУЛЬФОТИОЦИАНАТОВ СО СТИРОЛОМ И 1-ФЕНИЛТРИЦИКЛО[4.1.0.0^{2,7}]ГЕПТАНОМ

Петров П. С., Чалов П. А., Васин В. А.

Мордовский государственный университет, Саранск

Гомолитическое сульфони́рование непредельных соединений служит удобным способом получения алкилсульфо́нов – ценных исходных соединений в многостадийных синтезах. Ранее [1] сообщалось об использовании для этих целей некоторых арилсульфотиоцианатов. Мы изучили взаимодействие метан-, хлорметан- и бромметансульфотиоцианатов с двумя модельными соединениями – стиролом (I) и 1-фенилтрицикло[4.1.0.0^{2,7}]гептаном (II). Необходимые сульфотиоцианаты получали восстановлением соответствующих сульфохлоридов системой $\text{Na}_2\text{SO}_3\text{--NaHCO}_3$ при 0 °С с последующей обработкой образующихся сульфиданатов натрия бензольным раствором диуродана. Отметим, что ранее галогенметансульфотиоцианаты в литературе описаны не были. Реакции сульфороданирования проводили путем смешения и выдержива-